文章编号:1005-3085(2010)04-0627-10

带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法*

唐明筠

(中国农业大学理学院，北京 100083)

摘　要: 无约束非线性优化问题广泛存在于工程、科学计算等实际应用领域。本文在信赖域算法的框架下提出无约束子问题，将它与信赖子问题相结合，构造了求解无约束优化问题的双子问题信赖域算法。同时利用信赖域子问题得到的试探步一定是目标函数充分下降方向的性质使得每次求解信赖域子问题之后均能得到使目标函数下降的步。在标准假设下证明了该算法具有全局收敛性和局部二次收敛速度。数值结果表明该算法比传统的信赖域算法速度更快更有效。

关键词: 无约束优化；信赖域方法；双子问题；回溯；收敛性

分类号: **AMS**(2000) 65K05; 90C30　　**中图分类号**: O221.2　　**文献标识码**: A

1　引言

无约束优化是非线性最优化中的基本问题，它不但具有重要的理论意义，还在金融、工程、科学等许多领域都有着广泛的应用。求解无约束优化问题的算法很多，信赖域方法就是其中一种非常有效的方法。信赖域方法兴起于上个世纪七、八十年代，至今已建立了比较完善的框架和理论体系。但有时候由于信赖域约束的影响，算法的迭代步过于保守。比如当目标函数在一个比当前信赖域大很多的区域上凸时，可能需要很多步迭代才能使信赖域半径扩大到包含局部极小值点的区域。为了尽量减少这种情况的产生我们设计了一个新的算法，力图在保持信赖域算法优越的收敛性的同时节省计算量和计算时间。

一方面，通过引入一个不要求信赖域约束的无约束子问题，我们可以求得一个步长为1的牛顿步。根据模型函数的性质，我们选择求解信赖域子问题或者求解无约束问题。另一方面，由于信赖域子问题得到的试探步一定是目标函数的充分下降方向，可以将信赖域与线搜索技巧相结合，在试探步失败时进行回溯的线搜索[1]。

2　无约束子问题和双子问题信赖域算法

考虑无约束优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\quad f(x), \tag{1}$$

其中 f 是 $\mathbb{R}^n$ 上的实值二次连续可微函数，假设它是下方有界的。传统的信赖域算法是迭代类型的数值方法，将求目标函数在全空间的局部极小值点转化成求一系列目标函数的近似函数在全空间的某个子集也就是信赖域内的局部极小值点，最终得到目标函数的局部极小值点[2]。具

收稿日期: 2008-11-11.　**作者简介**: 唐明筠 (1982年10月生)，女，博士. 研究方向：非线性最优化.

***基金项目**: 国家自然科学基金 (10831006)；中国科学院知识创新工程 (kjcx-yw-s7-03).

体地说，假设当前是第 k 步迭代，迭代点为 x_k。求解信赖域子问题

$$\begin{cases} \min\limits_{d\in\mathbb{R}^n} & m_k(x_k+d) \\ \text{s.t.} & \|d\| \le \Delta_k, \end{cases} \tag{2}$$

其中 $m_k(x_k+d)$ 是目标函数 $f(x)$ 在以 x_k 为中心 Δ_k 为半径的信赖域内的近似模型。定义预估下降量和实际下降量的比值 ρ_k 为

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k+d_k)}{m_k(x_k) - m_k(x_k+d_k)}. \tag{3}$$

根据 ρ_k 的值决定是否接受试探步以及对信赖域半径如何调整

$$x_{k+1} = \begin{cases} x_k + d_k, & \text{如果} \ \ \rho_k \ge \eta_1, \\ x_k, & \text{如果} \ \ \rho_k < \eta_1, \end{cases}$$

$$\Delta_{k+1} = \begin{cases} [\Delta_k, \infty), & \text{如果} \ \ \rho_k \ge \eta_2, \\ [\gamma_2\Delta_k, \Delta_k], & \text{如果} \ \ \rho_k \in [\eta_1, \eta_2), \\ [\gamma_1\Delta_k, \gamma_2\Delta_k], & \text{如果} \ \ \rho_k < \eta_1, \end{cases}$$

其中常数满足 $0 < \eta_1 \le \eta_2 < 1$ 和 $0 < \gamma_1 \le \gamma_2 < 1$。这样进行迭代，一直到求得的迭代点处梯度的范数满足 $\|\nabla f(x_k)\| < \varepsilon$，其中 ε 是给定的终止参数[3,4]。

2.1 两个子问题

在传统的信赖域方法中，通常选取目标函数的Taylor展开式的前三项作为信赖域子问题中模型函数 m_k 的表达式，即

$$m_k(x_k+d) = f(x_k) + \left[\nabla_x f(x_k)\right]^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x_k) d. \tag{4}$$

于是，我们得到标准的信赖域子问题

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n} \quad f(x_k) + \left[\nabla_x f(x_k)\right]^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x_k) d \tag{5}$$

$$\text{s.t.} \quad \|d\|_2 \le \Delta_k, \tag{6}$$

我们引进无约束子问题，即不要求信赖域约束 (6)，只考虑无约束子问题 (5)。我们考虑无约束子问题的目的一方面是为了通过这个比较好求解的无约束模型节省计算量，另一方面是尽量在一个迭代步中走得更远，从而使算法更快地收敛。

显然，当模型函数 (4) 非凸的时候无约束子问题 (5) 是不合适的，而且不加限制地使用无约束子问题可能会导致算法不收敛，因此只在Hessian矩阵正定时我们才选取无约束子问题。在算法开始时根据Hessian矩阵是否正定来决定子问题的选取，若矩阵正定选取无约束子问题，否则选取信赖域子问题。在算法的中间迭代过程中除了利用比值 ρ_k 的值来决定是否接受试探步以及信赖域半径的调整以外，还利用这个比值判断是否要更换子问题。具体地做法是当选取的是无约束子问题求得的牛顿步而且 ρ_k 的值小于一个正常数 η_2 时或者 $\nabla^2 f(x_k)$ 不正定的时候，我们就认为可能无约束子问题是不合适的，因此在下一步选择求解信赖域子问题。如果前面的迭代步是求解信赖域子问题，而当前模型函数是凸函数并且和目标函数吻合得很好，我们

就重新选取无约束子问题。在我们的算法里利用比值 ρ_k 是否在连续两步迭代中都比给定的常数 β 大来判断模型函数和目标函数是否吻合得很好，其中常数 $\beta \to 1$ 且 $\beta < 1$。这些规则使得无约束子问题中的 $\nabla^2 f(x_k)$ 一定是正定的。此时求解无约束子问题的极小值点等价于求

$$\nabla m_k(x_k + d) = 0,$$

也就是求解线性方程组

$$\nabla^2 f(x_k)d = -\nabla_x f(x_k).$$

$\nabla^2 f(x_k)$ 正定性的判断可以使用 Cholesky 分解进行，由于求信赖域子问题的精确解[5] 的算法也需要 Cholesky 分解而且 Cholesky 分解的结果也可以用于直接法求解上面的方程，因此并没有引起计算量的浪费。

2.2　回溯的线搜索

求解信赖域子问题 (2) 的时候，由于可以证明试探步 d_k 总是目标函数的一个充分下降方向[1]，因此当迭代步 d_k 使得目标函数值上升的时候总可以沿 d_k 进行回溯的线搜索找到使 f 下降的点。

回溯线搜索实际上就是找一个满足

$$f(x_k + \alpha^i d_k) < f(x_k)$$

的最小正整数 i，其中 $\alpha \in (0,1)$ 是一个正的常数。在文献 [1] 中给出了步长 α 的一个选取方式

$$\alpha = \frac{0.5}{1 + (f(x_k) - f(x_k + d_k))/d_k^T \nabla_x f(x_k)},$$

这是通过截断二次插值得到的。因为在我们的算法里面 $f(x_k)$, $\nabla_x f(x_k)$, $\nabla^2 f(x_k)$, $f(x_k + d_k)$ 的信息都是有的，因此我们可以利用更高阶的插值得到 α。令

$$q = \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k,$$

则

$$\alpha = -\frac{[\nabla_x f(x_k)]^T d_k}{q + \sqrt{q^2 - 3[\nabla_x f(x_k)]^T d_k (f(x_k + d_k) - q - [\nabla_x f(x_k)]^T d_k - f(x_k))}},$$

当分母为零时可以取

$$\alpha = -\frac{[\nabla_x f(x_k)]^T d_k}{d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k},$$

或者截断二次插值得到的结果。为避免 α_k 过小的情况，实际计算时取 $\alpha_k = \max[0.1, \alpha]$。

根据以上思想，带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法的主要做法就是在信赖域算法的框架下，在较大的凸区域里利用无约束子问题求得牛顿步，并且在需要的时候将信赖域子问题与回溯线搜索相结合。

算法 1　带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法。

步 1 初始化。 给出初始点 x_0 以及初始信赖域半径 $\Delta_0 > 0$。给定常数 η_1, η_2, γ_1, γ_2, γ_3, β 且满足

$$0 < \eta_1 \le \eta_2 < \beta < 1, \quad 0 < \gamma_1 \le \gamma_2 < 1 \le \gamma_3.$$

令 $\mathrm{iter} := 0$, $\mathrm{btime} := 0$, $f_{\min} := f(x_0)$。定义开关 $TR := 0$。

步2计算试探步。 若$\nabla^2 f(x_k)$不正定，令$TR := 1$。若$TR = 1$，求解信赖域子问题(2)，否则求解无约束子问题(5)得到步长为1的牛顿步。

步3回溯线搜索。 计算试探点$x_t = x_k + d_k$及相应的函数值$f(x_t)$。令$\text{iter} := \text{iter} + 1$。

若$f(x_t) \geq f_{\min}$

若$TR = 1$，则进行回溯线搜索得到x_{k+1}，$f_{\min} := f(x_{k+1})$，$\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$，转步2。

若$TR = 0$，则令$TR := 1$，$x_{k+1} = x_k$。若$\|d_k\| > \Delta_k$，则转步2，否则$\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$，转步2。

否则计算

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_t)}{m_k(x_k) - m_k(x_t)}.$$

步4接受试探步并更新信赖域半径与开关。 $f_{\min} = f(x_t)$，$x_{k+1} = x_t$。

若$\rho_k \geq \eta_2$

若$TR = 1$且$\rho_k > \beta$，则$\text{btime} := \text{btime} + 1$，$\Delta_{k+1} := \gamma_3\Delta_k$。若$\text{btime} = 2$，则$TR := 0$，$\text{btime} := 0$，转步2。否则，转步2。

若$TR = 1$，则$\Delta_{k+1} := \gamma_3\Delta_k$，$\text{btime} := 0$，转步2。

若$TR = 0$，转步2。

若$0 < \rho_k < \eta_2$

若$TR = 0$，则令$TR := 1$，$\text{btime} := 0$。若$\|d_k\| > \Delta_k$，转步2；若$\rho_k < \eta_1$，则$\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$，转步2；否则转步2。

若$TR = 1$，则$\text{btime} := 0$。若$\rho_k < \eta_1$，则$\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$。转步2。

3 收敛性

在这一节我们给出关于带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法的收敛性的一些结果。首先给出一个引理[1]。

引理1 若d_k是信赖域子问题(2)的解，则必存在一个正的常数τ使得

$$m(x_k) - m(x_k + d_k) \geq \tau\|\nabla_x f(x_k)\| \min\left\{\Delta_k, \|\nabla_x f(x_k)\|/\|\nabla^2 f(x_k)\|\right\}. \tag{7}$$

这个引理的证明可以参阅文献[1]，这里不再赘述。有了这个引理，我们可以得到如下定理。

定理1 假设$f(x)$是二次连续可微的实值函数并且是下方有界的，假设$\nabla_x f(x)$一致连续且对所有的$x \in \mathbb{R}^n$都有$\|\nabla^2 f(x)\| \leq \kappa_{ufh}$，其中$\kappa_{ufh}$是一个正常数。对于模型函数假设$m_k(x_k) = f(x_k)$，则有

$$\liminf_{k\to\infty} \left\|\nabla_x f(x_k)\right\| = 0. \tag{8}$$

证明 定义

$$\beta_k \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \max_{x\in\mathcal{B}_k} \left\|\nabla^2 f(x_k)\right\|, \tag{9}$$

其中$\mathcal{B}_k = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x_k\| \leq \Delta_k\}$。为了得到矛盾，我们假设对所有的$k$，有

$$\left\|\nabla_x f(x_k)\right\| = \left\|\nabla_x f(x_k)\right\| \geq \epsilon, \tag{10}$$

对某个 $\epsilon > 0$ 成立。定义 $I = J \cup M$ 是满足 $\rho_k \geq \eta_1$ 的整数 k 的集合，其中 J 包含的是由无约束子问题得到的迭代步的指标，而 M 是由信赖域子问题得到的迭代步的指标。由于算法 1 得到的迭代步是单调下降的，因此对于牛顿步 $k \in J$，我们有

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x_{k+1}) &\geq \eta_1\big[m_k(x_k) - m_k(x_k + d_k)\big] \\ &= \frac{1}{2}\eta_1 g_k^T B_k^{-1} g_k \geq \frac{1}{2}\eta_1 \frac{\|g_k\|^2}{\beta_k}, \end{aligned} \tag{11}$$

其中我们利用 (9) 得到第二个不等式。对于迭代 $k \in M$，根据我们的假设及引理 1 必存在一个常数 μ 满足

$$m(x_k) - m(x_k + d_k) \geq \mu \min\{\Delta_k, 1/\|B_k\|\}. \tag{12}$$

故

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x_{k+1}) &\geq \eta_1\big[m_k(x_k) - m_k(x_k + d_k)\big] \\ &\geq \mu\eta_1 \min\{\Delta_k, 1/\|B_k\|\} \geq \mu\eta_1 \min\{\Delta_k, 1/\beta_k\}. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty}\big[f(x_k) - f(x_{k+1})\big] &\geq \sum_{k \in I}\big[f(x_k) - f(x_{k+1})\big] \\ &\geq \frac{1}{2}\sum_{k \in J}\eta_1 \frac{\|g_k\|^2}{\beta_k} + \mu\eta_1 \sum_{k \in M} \min\{\Delta_k, 1/\beta_k\}. \end{aligned}$$

由于 $f(x)$ 下方有界，故 J 中只存在有限个元素且

$$\lim_{\substack{k \to \infty \\ k \in I}} \min\{\Delta_k, 1/\beta_k\} = 0. \tag{13}$$

我们现在证明这个结果对于 $k \notin I$ 也是成立的。若 I 有限，由算法 1 我们知道

$$\Delta_{k+1} \leq \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k,$$

对于所有足够大的 k 成立，故 $\{\Delta_k\} \to 0$，再加上我们选择无约束子问题的规则，必有

$$\lim_{k \to \infty} \min\{\Delta_k, 1/\beta_k\} = 0. \tag{14}$$

若 I 是无限的，考虑一个指标 $j \notin I$。令 $\hat{j}$ 为满足 $\hat{j} \in I$ 的小于 j 的最大整数。由于 $\{\beta_j\}$ 是单调增的且 $\Delta_j \leq \gamma_3 \Delta_{\hat{j}}$，我们得到

$$\min\{\Delta_j, 1/\beta_j\} \leq \gamma_3 \min\{\Delta_{\hat{j}}, 1/\beta_{\hat{j}}\}. \tag{15}$$

故 (14) 成立。但与文献 [1] 中引理 3.5 相似，我们可以证明对于所有迭代存在 Δ_k 的下界。这与 (14) 矛盾。因此我们的假设 (10) 必定是错误的，从而得到 (8)。

由上述两个引理，不难得到关于带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法的全局收敛性及局部收敛速度的估计。

定理2 在引理1的假设下，设$\{x_k\}$是算法1得到的迭代点列。若$\{x_k\}$收敛到点x^*满足$\nabla^2 f(x^*)$正定，则收敛速度是二次的，即

$$\|x_{k+1}-x^*\| = O\big(\|x_k - x^*\|_2^2\big). \tag{16}$$

证明 根据无约束模型函数的选取规则，(16)的证明与文献[6]中的定理5.1.2类似。故定理得证。

可见，带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法很好地保持了传统的信赖域算法的收敛性质。

4 数值实验

这一节我们给出带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法的数值实验结果。我们将这个算法与传统的信赖域方法相比较，选取的测试函数是CUTEr测试集[7]的153个无约束优化问题。问题的名字和维数详见表1及表2。

表1: 测试问题及相应的维数

问题	维数	问题	维数	问题	维数	问题	维数
AKIVA	2	DIXMAANG	300	HILBERTB	10	PENALTY3	50
ALLINITU	4	DIXMAANH	300	HIMMELBB	2	POWELLSG	1000
ARGLINA	100	DIXMAANI	300	HIMMELBF	4	POWER	100
ARGLINB	100	DIXMAANJ	300	HIMMELBG	2	QUARTC	1000
ARGLINC	10	DIXMAANK	15	HIMMELBH	2	ROSENBR	2
ARWHEAD	1000	DIXMAANL	300	HUMPS	2	S308	2
BARD	3	DIXON3DQ	1000	HYDC20LS	99	SBRYBND	100
BDQRTIC	1000	DJTL	2	INDEF	1000	SCHMVETT	1000
BEALE	2	DQDRTIC	1000	JENSMP	2	SCOSINE	10
BIGGS6	6	DQRTIC	1000	KOWOSB	4	SCURLY10	100
BOX3	3	EDENSCH	2000	LIARWHD	1000	SCURLY20	100
BRKMCC	2	EG2	1000	LOGHAIRY	2	SCURLY30	100
BROWNAL	10	EIGENALS	110	MANCINO	100	SENSORS	10
BROWNBS	2	EIGENBLS	110	MARATOSB	2	SINEVAL	2

我们使用的是问题提供的初始点和精确一阶及二阶导数。测试环境是Dell OptiPlex 755型计算机(2.66 GHz, 1.96 GB of RAM)，Linux (fedora core 8)操作系统，gcc编译器(version 4.2.3)，选用双精度进行实验。当迭代步数超过1000步或者CPU时间超过1小时则算法强制中止。此时我们认为算法对该问题的求解失败。由于目前信赖域方法对于参数的选择没有公认的标准[2]，而且算法表现对于参数变化也不敏感，故参数选取只需要符合算法1步1中的条件即可。具体取值如下

$$\gamma_1 = 0.1, \quad \gamma_2 = 0.6, \quad \gamma_3 = 2.5, \quad \eta_1 = 0.1, \quad \eta_2 = 0.75, \quad \beta = 0.9, \quad \Delta_0 = 1.$$

使用子程序GQTPAR[5]精确求解信赖域子问题。两个算法的中止准则都是$\|\nabla f(x_k)\| \leq 10^{-6}$。

带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法成功地求解了135个问题而传统的信赖域算法成功求解了136个问题。因此这个新算法和传统算法的可靠性是一致的。两个算法在13个问题上都失败了。在剩下的140个问题中，新算法在96个问题上需要的迭代次数更少，其中最好的比值是1:17。在23个问题的求解过程中这两种算法需要相同的迭代次数以及函数值、梯度值、Hessian矩阵的求值次数。传统的信赖域算法在13个问题上需要较少的迭代和求值次数。有8个问题两个算法的迭代次数相同但是传统的算法需要的求值次数少。

表2: 测试问题及相应的维数

问 题	维数	问 题	维数	问 题	维数	问 题	维数
BROWNDEN	4	EIGENCLS	30	MEXHAT	2	SINQUAD	500
BROYDN7D	1000	ENGVAL1	1000	MEYER3	3	SISSER	2
BRYBND	1000	ENGVAL2	3	MODBEALE	2000	SNAIL	2
CHAINWOO	1000	ERRINROS	50	MOREBV	1000	SPARSINE	1000
CHNROSNB	50	EXPFIT	2	MSQRTALS	100	SPARSQUR	1000
CLIFF	2	EXTROSNB	10	MAQRTBLS	100	SPMSRTLS	499
COSINE	10	FLETCBV2	1000	NONCVXU2	100	SROSENBR	1000
CRAGGLVY	100	FLETCBV3	10	NONCVXUN	100	STRATEC	10
CUBE	2	FLETCHBV	10	NONDIA	1000	TESTQUAD	1000
CURLY10	1000	FLETCHCR	100	NONDQUAR	1000	TOINTGOR	50
CURLY20	1000	FMINSRF2	121	NONMSQRT	49	TOINTGSS	1000
CURLY30	1000	FMINSURF	121	OSBORNEA	5	TOINTPSP	50
DECONVU	61	FREUROTH	500	OSBORNEB	11	TIONTQOR	50
DENSCHNA	2	GENHUMPS	500	OSCIPATH	15	TQUARTIC	1000
DENSCHNB	2	GENROSE	100	PALMER1C	8	TRIDIA	1000
DENSCHNC	2	GROWTHLS	3	PALMER1D	7	VARDIM	100
DENSCHND	3	GULF	3	PALMER2C	8	VAREIGVL	50
DENSCHNE	3	HAIRY	2	PALMER3C	8	VIBRBEAM	8
DENSCHNF	2	HATFLDD	3	PALMER4C	8	WATSON	12
DIXMAANA	1500	HATFLDE	3	PALMER5C	6	WOODS	1000
DIXMAANB	1500	HEART6LS	6	PALMER6C	8	YFITU	3
DIXMAANC	300	HEART8LS	8	PALMER7C	8	ZANGWIL2	2
DIXMAAND	300	HELIX	3	PALMER8C	8		
DIXMAANE	300	HIELOW	3	PENALTY1	100		
DIXMAANF	300	HILBERTA	2	PENALTY2	100		

另外，也可以考虑将我们的算法中选择无约束子问题的标准适当放宽，即我们增加一个常数η_3，满足$\eta_1 < \eta_3 < \eta_2$。将算法的第4步当$0 < \rho_k < \eta_2$时的步骤做如下调整：

若 $0 < \rho_k < \eta_2$

若 $TR = 0$

若 $\rho_k < \eta_3$，则令 $TR := 1$, $\text{btime} := 0$。

若 $\|d_k\| > \Delta_k$，则转步 2；否则若 $\rho_k < \eta_1$，则 $\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$，转步 2；否则转步 2。

若 $TR = 1$，则 $\text{btime} := 0$。若 $\rho_k < \eta_1$，则 $\Delta_{k+1} := \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\Delta_k$。转步 2。

这样当无约束子问题得到的试探步对应的比值 $\rho_k < \eta_2$ 的时候并一定下一步就选择求解信赖域子问题，只有当 ρ_k 小于一个比 η_2 还小的常数 η_3 的时候才认为无约束子问题是不合适的，在后面一步迭代变换子问题。前面叙述的算法相当于取 $\eta_3 = \eta_2 = 0.75$ 的情形。

图 1，图 2，图 3，图4，图 5 分别给出了我们的新算法迭代次数、迭代时间、目标函数求值次数、梯度求值次数、Hessian 矩阵求值次数与信赖域算法相比较的性能描述[8]。图中横轴 τ 是一个大于 1 的常数。纵轴中

$$r_{p,s} = \frac{t_{p,s}}{\min\{t_{p,s} : s \in S\}},$$

其中 S 是算法的集合，即我们要比较的 2 个算法，故 $n_s = 2$。$t_{p,s}$ 是我们要比较的特定算法 s 求解问题 p 的迭代次数、时间或函数、梯度、Hessian 矩阵的求值次数。而

$$P(r_{p,s} \leq \tau : 1 \leq s \leq n_s) = \frac{1}{n_p} \text{size}\{p \in P : r_{p,s} \leq \tau\},$$

其中 P 是测试问题的集合，n_p 是测试问题的个数。因此由图 1 我们可以看出，当 $\tau = 2$, $P > 0.9$，即对于 CUTEr 测试集中的无约束测试问题，对超过 90% 的算例我们的算法至多需要最佳算法 2 倍的迭代步数即可对问题求解。我们也计算了 η_3 取 0.3, 0.5 的情况，数值实验得到的结果与取 $\eta_3 = 0.75$ 差别很小，图像几乎是重合的。由图像容易看出新算法比传统的算法效率更高。由于新的算法并没有带来计算量的浪费而通常求解一个步长为 1 的牛顿步都比求解信赖域子问题计算量小，因此我们的新算法在计算时间上的优势也是很明显的，尤其是当问题的维数比较大的时候。

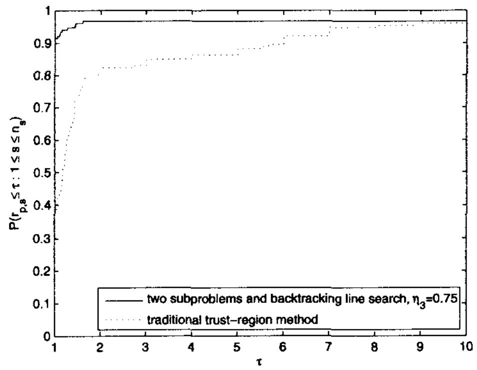

图 1: 迭代次数的性能描述

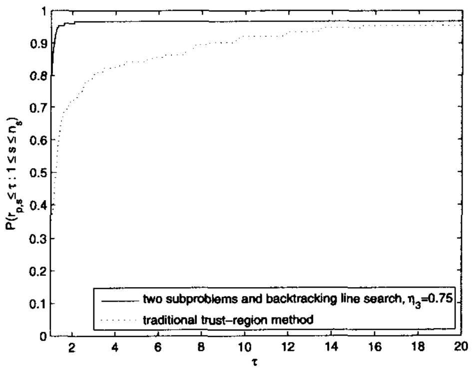

图 2: 迭代时间的性能描述

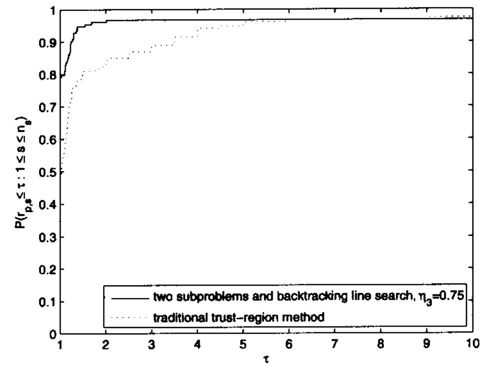

图 3:　目标函数求值次数的性能描述

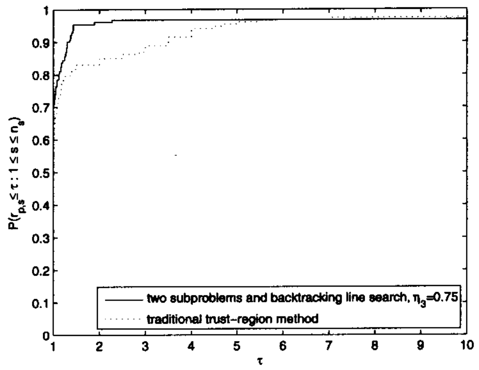

图 4:　梯度求值次数的性能描述

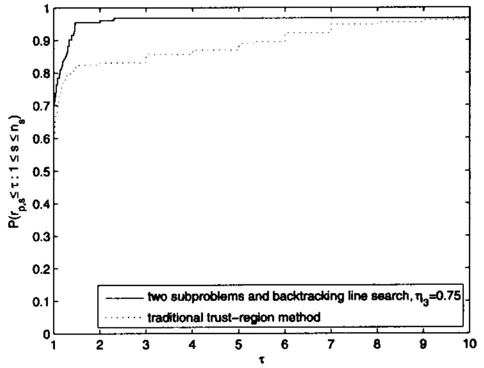

图 5:　Hessian 矩阵求值次数的性能描述

5　结论

我们提出了求解无约束优化问题的一个带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法并证明在标准假设下，这个算法是全局收敛的并且具有局部二次收敛速度。通过对 CUTEr 测试集无约束问题进行的数值试验的结果可以看出，带回溯线搜索步的双子问题信赖域算法无论是在迭代次数、迭代时间还是在函数及其梯度、Hessian 矩阵的求值方面都比传统的信赖域算法更有效。

致谢：作者衷心感谢导师袁亚湘研究员对本文提出的修改意见。

参考文献：

[1] Nocedal J, Yuan Y. Combining trust region and line search techniques[J]. Advances in Nonlinear Programming, Kluwer Academic Publishers, 1998: 153-176

[2] Conn A R, Gould N I M, Toint Ph L. Trust-Region Methods[M]. Philadelphia: SIAM, 2000

[3] 袁亚湘. 非线性规划数值方法[M]. 上海：上海科学技术出版社，1993
Yuan Y X. Numerical Methods for Nonlinear Programming[M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Publisher, 1993

[4] 袁亚湘，孙文瑜. 最优化理论与方法[M]. 北京：科学出版社，1997
Yuan Y X, Sun W Y. Optimization Theories and Methods[M]. Beijing: Science Press, 1997

[5] Moré J J, Sorensen D C. Computing a trust region step[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1983, 4(3): 553-572

[6] Fletcher R. Practical Methods of Optimization[M]. New York: John Wiley and Sons, 1980

[7] Gould N I M, Orban D, Toint Ph L. CUTEr (and sifDec), a constrained and unconstrained testing environment, revisited[J]. Transactions of the ACM on Mathematical Software, 2003, 29(4): 373-394

[8] Dolan E D, Moré J J. Benchmarking optimization software with performance profiles[J]. Mathematical Programming, 2002, 91(2): 201-213

A Trust-region Method with Two Subproblems and Backtracking Line Search

TANG Ming-yun

(College of Science, China Agricultural University, Beijing 100083)

Abstract: Unconstrained optimization problems occur frequently in many real world applications such as engineering and scientific computing. Under the trust-region framework, we combine an unconstrained subproblem with a trust-region subproblem, and propose a trust-region method with two subproblems for solving unconstrained optimization. A backtracking line search is carried out if the trust-region trail step fails since there is always a sufficient descent direction for the objective function. The global convergence and the local quadratic convergence rate are proved under standard assumptions. Numerical results show that this algorithm is reliable and more efficient.

Keywords: unconstrained optimization; trust-region methods; two subproblems; backtracking; convergence

Received: 11 Nov 2008. **Accepted:** 09 Apr 2010.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (10831006); CAS (kjcx-yw-s7-03).